Vol. **17**, **1**, 61–82 (2001)

Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería

Una formulación general y eficiente de las fracturas en el MEF: II. Aplicación a casos sintéticos

Ruben Juanes y Javier Samper

Grupo de Hidrología Subterránea
ETS de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos
Universidad de La Coruña
Campus de Elviña, 15192 La Coruña, España
Tel.: 34-981-167 000, Fax: 34-981-167 170
e-mail: juanes@ce.berkeley.edu
e-mail: samper@iccp.udc.es

Resumen

Este trabajo forma parte de una serie de dos artículos en los que se presenta una formulación numérica eficiente y completamente general para el tratamiento de fracturas embebidas en un medio poroso y de las condiciones de contorno en el método de elementos finitos[1]. En el primero de ellos[2] se presentan las expresiones para el cálculo de las derivadas Cartesianas y para la evaluación de las integrales sobre hipersuperficies m-dimensionales en espacios Euclidianos n-dimensionales. Este tratamiento conduce a una formulación compacta que es aplicable a la integración numérica en líneas, superficies y volúmenes en dominios tridimensionales, evitándose de esta forma los cálculos farragosos de la formulación tradicional. En este segundo artículo se presenta la aplicación de esta formulación a tres casos sintéticos de flujo de agua y transporte de solutos a través de medios porosos y fracturados: 1) bloque de roca rectangular con una fractura, 2) bloque de roca rectangular con una red de fracturas ortogonales interconectadas y 3) bloque de roca tridimensional con una fractura vertical. Las simulaciones realizadas ilustran claramente el potencial y la aplicabilidad de la formulación propuesta y ponen de manifiesto que el tratamiento de las fracturas con elementos de menor dimensión que el dominio (por ejemplo, elementos 1D en medios 2D) redunda en soluciones numéricas más precisas y menos costosas que las obtenidas con la formulación tradicional de elementos finitos.

A GENERAL AND EFFICIENT FORMULATION FOR FRACTURES IN THE F.E.M.: II. APPLICATION TO SYNTHETIC CASES

Summary

In this series of two papers an efficient numerical formulation for the implementation of boundaries and fractures embedded in porous media by the finite element method is presented[1]. In the first of these papers[2] the expressions for the computation of Cartesian derivatives and integrals over m-dimensional surfaces within n-dimensional Euclidean spaces are derived. This leads to a compact formulation which allows to integrate numerically over lines, surfaces and volumes in three dimensional domains, avoiding the convoluted computations of classical formulations. The second paper includes three synthetic cases of solute transport through porous and fractured media: 1) rectangular block with a fracture, 2) rectangular block with a network of connected orthogonal fractures, and 3) three dimensional block with a vertical fracture. These simulations not only illustrate the potential and applicability of the proposed formulation, but also demonstrate its numerical advantages over traditional formulations. Representing fractures with elements of lower dimension than the domain (e.g., 1D elements in a 2D medium) leads to more accurate and numerically efficient solutions.

©Universitat Politècnica de Catalunya (España). ISSN: 0213–1315 Recibido: Julio 1999

INTRODUCCIÓN

En esta serie de dos artículos se presenta una formulación general y eficiente para el tratamiento numérico de fracturas y condiciones de contorno en modelos de elementos finitos. En este segundo artículo de la serie se presentan una serie de ejemplos sintéticos de flujo y transporte de solutos en medios porosos y fracturados que ilustran el potencial y la eficiencia de la formulación propuesta. La incorporación de fracturas y vías preferentes de flujo es crucial a la hora de representar de forma adecuada el comportamiento hidromecánico de las formaciones geológicas. La existencia de zonas fracturadas, cuya conductividad hidráulica es varios órdenes de magnitud mayor que la del macizo rocoso, suele dominar el esquema de flujo regional. Dado que el campo de velocidades del agua está controlado en gran medida por la presencia de fracturas, la correcta predicción de los fenómenos de transporte de solutos depende de una representación adecuada de la fracturación del medio. Por los motivos expuestos en el primer artículo[2], se ha optado por un modelo de fracturas embebidas en el medio poroso, que resuelve simultáneamente las ecuaciones de flujo y transporte en el medio poroso y en las fracturas. Aunque este modelo está especialmente diseñado para la representación de zonas de fractura de gran extensión superficial y grandes fracturas regionales, también es aplicable a fracturas de menor escala y a medios fracturados generados estocásticamente. Asimismo, la formulación matemática es completamente general, de modo que es aplicable a sistemas de flujo bidimensional y tridimensional con fracturas 1D y 2D que se intersecan entre sí. Es factible la aplicación de este modelo a problemas definidos por otras ecuaciones, como las de la elasticidad, la elastoplasticidad y campos acoplados (por ejemplo, temperatura y deformación).

Primeramente se presenta una breve descripción del programa TRANMEF-3: un código en elementos finitos para la resolución de las ecuaciones de flujo subterráneo, transporte de varios solutos reactivos y transporte de calor a través de medios porosos y fracturados. A continuación se muestran varios ejemplos de aplicación del código a tres casos sintéticos, que ilustran el potencial, la aplicabilidad y las ventajas numéricas de la formulación propuesta para el tratamiento de fracturas y contornos.

EL CÓDIGO TRANMEF-3

TRANMEF-3 es un programa de cálculo que resuelve la ecuación del flujo subterráneo, la del transporte de varios solutos y la del transporte de calor en medios porosos y fracturados completamente tridimensionales por el Método de Elementos Finitos. El código desarrollado tiene el mérito de ampliar el rango de aplicabilidad de los códigos, comerciales y de investigación, actualmente disponibles.

No existe restricción alguna respecto al dominio del problema, pudiendo ser:

1) *Unidimensional.* Puede ser conveniente para tratar problemas puramente unidimensionales o bidimensionales con simetría radial.
2) *Bidimensional horizontal.* Este ha sido el dominio tradicionalmente empleado para el flujo en acuíferos, en los que la variación de las variables de estado en la dirección vertical es despreciable frente a la variación en la dirección horizontal.
3) *Bidimensional vertical.* Se emplea cuando la variación de las variables de estudio es mucho mayor en la dirección vertical que en la lateral.
4) *Cuasi-tridimensional.* Generalmente consiste en un dominio que se discretiza en diversas capas bidimensionales horizontales, que representan los acuíferos, conectados entre sí mediante elementos unidimensionales verticales que representan los acuitardos. Se puede emplear para simular medios fracturados o como simplificación de medios tridimensionales[3–7].

5) *Tridimensional.* Tratamiento completamente 3D. Se debe emplear para representar adecuadamente situaciones en que el flujo y/o transporte es claramente tridimensional. En la bibliografía existen ejemplos sintéticos[8] y casos reales[9] de este tipo de situaciones.
6) *Multidimensional.* Se denomina así a la combinación de los dominios anteriores, para representar formaciones tridimensionales que contengan estructuras unidimensionales o bidimensionales embebidas en ellas. Tiene su campo de aplicación más importante en la simulación del flujo y transporte en medios fracturados[10]. En la bibliografía se describe un código con características similares a TRANMEF-3 y aplicable a este tipo de dominios[11].

El usuario puede emplear hasta diez tipos de elementos diferentes que pueden emplearse conjuntamente en cualquier simulación. Estos elementos pueden no ser necesariamente de la misma dimensión: pueden ser 1D, 2D ó 3D, lo cual permite simular redes de fracuras bidimensionales y sus intersecciones unidimensionales en un medio tridimensional[12]. El programa realiza un tratamiento riguroso de las condiciones de borde mediante una integración completa sobre los contornos del dominio.

El régimen de flujo y transporte puede ser estacionario o transitorio. Las condiciones iniciales se pueden definir explícitamente o consistir en el resultado de una simulación estacionaria. El programa resuelve las siguientes ecuaciones:

1) *Flujo subterráneo.* Se resuelve la ecuación de flujo en su forma lineal. Esto implica que el programa, estrictamente, no es aplicable a problemas con superficie libre, simulaciones en la zona no saturada o con efectos de densidad variable. En la ecuación se consideran el flujo de tipo Darcy, el almacenamiento, recarga volumétrica y términos fuente/sumidero. Las condiciones de contorno son generales, siempre que sean lineales: Neumann, Dirichlet y Mixta, distribuidas a lo largo de los contornos exteriores o interiores.
2) *Transporte de solutos.* Después de resolver la ecuación de flujo —bien en régimen estacionario o transitorio—, y una vez que se han calculado las velocidades de Darcy en los puntos de Gauss de los elementos del dominio, TRANMEF-3 permite la simulación del transporte de solutos incluyendo los siguientes términos: difusión molecular, dispersión hidrodinámica, advección, almacenamiento, recarga, fuentes/sumideros, desintegración radiactiva y adsorción. La difusión en la matriz a lo largo de las fracturas se considera automáticamente dado que el programa resuelve las ecuaciones de flujo y transporte en la formación porosa así como en las fracturas. Se pueden simular simultáneamente tantas especies como se desee, cada una de ellas con su propia constante de desintegración λ y su coeficiente de distribución para adsorción K_d. Se incluyen los mismos tres tipos de condiciones de contorno —Neuman, Dirichlet y Mixta.
3) *Transporte de calor.* Son aplicables las mismas consideraciones que para el transporte de solutos, ya que existe una analogía perfecta entre ambas ecuaciones (ver la Tabla I en el primer artículo de la serie[2]).

El código incorpora una rutina para la renumeración de los nudos de la malla de elementos finitos basada en la teoría de grafos y que es completamente transparente al usuario. El objeto de la renumeración nodal es reducir el perfil de las matrices de coeficientes que resultan de la discretización de las ecuaciones diferenciales. Se debe enfatizar la importancia de dicha renumeración, ya que los requisitos de almacenamiento en memoria y tiempo de CPU disminuyen varios órdenes de magnitud para simulaciones con un número de nudos elevado. El programa principal y todas sus subrutinas constituyen un código de más de 25 000 líneas implementado de forma eficiente en lenguaje FORTRAN y verificado en numerosos casos con solución analítica[1]. En resumen, TRANMEF-3 es un programa que constituye un modelo numérico *general* para la resolución de problemas de flujo, transporte de solutos y transporte de calor en formaciones subterráneas heterogéneas —medios porosos y fracturados.

CASO 1: BLOQUE RECTANGULAR DE ROCA CON UNA FRACTURA

Descripción del problema

El primer caso corresponde a un problema clásico de transporte de un soluto conservativo a través de un medio fracturado. El objeto de este caso es doble. Por una parte permite la verificación de la formulación adoptada ya que dispone de solución analítica y ha sido estudiado con anterioridad por Grisak y Pickens[13]. Por otra parte, ilustra el papel de la difusión en la matriz en el transporte de solutos en medios fracturados. La *difusión en la matriz* es el mecanismo de transporte por el cual existe una transferencia de soluto desde las zonas permeables con flujo de agua (fracturas) hacia las zonas donde apenas hay flujo de agua (matriz). Carrera *et al.*[14] proporcionan una exhaustiva revisión sobre distintas formulaciones y efectos cualitativos del proceso de difusión en la matriz.

El dominio de flujo consiste en un medio poroso rectangular con una fractura en el sentido longitudinal, tal y como se muestra en la Figura 1. Se considera flujo de agua de izquierda a derecha a lo largo de la fractura, cuya conductividad hidráulica es mucho mayor que la de la matriz. Inicialmente la concentración del soluto es nula en todo el dominio. El agua entra de forma continua en la fractura con una concentración C_0. Se supone que el soluto se transporta en la fractura exclusivamente por advección y que se difunde en la matriz —sólo en la dirección y.

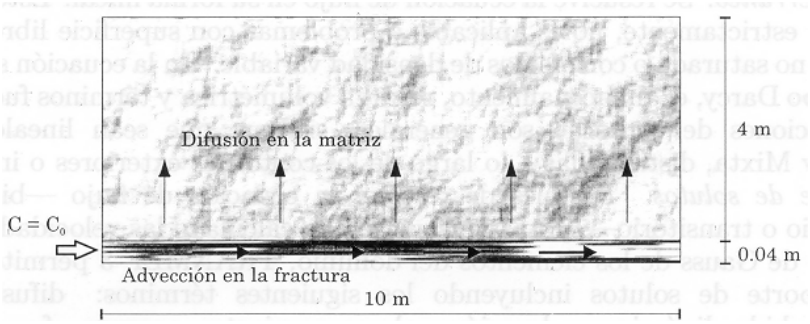

Figura 1. Esquema del Caso 1: bloque de roca rectangular con una fractura en su contorno inferior

Formulación matemática y solución analítica

La formulación matemática del problema se basa en las siguientes condiciones:

1) La concentración en la fractura sólo varía en la dirección x.
2) El transporte del soluto en la fractura es debido únicamente a la advección.
3) Existe equilibrio en la interfaz matriz-fractura.
4) Sólo existe difusión en la matriz en la dirección y.
5) La distancia a la que penetra el soluto es pequeña en comparación con el espesor de la matriz.

Para estas condiciones, las ecuaciones que gobiernan las concentraciones en la fractura c_f y en la matriz c_m son, respectivamente:

$$\phi_f b \left(\frac{\partial c_f}{\partial t} + v_f \frac{\partial c_f}{\partial x} \right) = D_m \frac{\partial c_m}{\partial y} \qquad x > 0,\ y = 0,\ t > 0 \tag{1}$$

y

$$\phi_m \frac{\partial c_m}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 c_m}{\partial y^2} \qquad x > 0,\ y > 0,\ t > 0 \tag{2}$$

con las condiciones iniciales

$$c_f(x,0) = c_m(x,y,0) = 0 \qquad x > 0,\ y > 0,\ t = 0 \tag{3}$$

y las condiciones de contorno

$$c_f(0,t) = c_m(0,0,t) = C_0 \qquad x = 0, y = 0,\ t > 0 \tag{4}$$

$$c_f(x,t) = c_m(x,0,t) \qquad x > 0,\ y = 0,\ t > 0 \tag{5}$$

donde b es la semiapertura de la fractura, ϕ_f es la porosidad de la fractura, ϕ_m es la porosidad de la matriz, v_f es la velocidad del agua en la fractura, D_m es el coeficiente de difusión efectivo en la matriz y (x, y) denotan las coordenadas globales del dominio. El origen de coordenadas se encuentra en la esquina inferior izquierda de la matriz. La solución analítica a este problema† viene dada (adaptada de [15]) por

$$\frac{c_f}{C_0} = \begin{cases} \operatorname{erfc}\left(\dfrac{(D_m/v_f\phi_f b)x}{2\left[(D_m/\phi_m)(t - x/v_f)\right]^{1/2}}\right) & t > x/v_f \\ 0 & t \le x/v_f \end{cases} \tag{6}$$

y

$$\frac{c_m}{C_0} = \begin{cases} \operatorname{erfc}\left(\dfrac{(D_m/v_f\phi_f b)x + y}{2\left[(D_m/\phi_m)(t - x/v_f)\right]^{1/2}}\right) & t > x/v_f \\ 0 & t \le x/v_f \end{cases} \tag{7}$$

donde erfc es la función complementaria de error.

Solución numérica

Se han considerado dos modelos distintos para la discretización en elementos finitos de la fractura. El "Modelo 2D" emplea la formulación tradicional de elementos finitos y discretiza la fractura con elementos 2D. El "Modelo 1D" utiliza la formulación propuesta en esta serie de artículos, discretizando la fractura con elementos 1D.

Los valores numéricos de los parámetros empleados en la solución analítica son los siguientes: $b = 0.04\,\mathrm{m}$, $v_f = 0.01\,\mathrm{md^{-1}}$, $\phi_f = 0.1$, $\phi_m = 0.01$, $D_m = 10^{-5}\,\mathrm{m^2d^{-1}}$ y $C_0 = 1\,\mathrm{mgL^{-1}}$. Para reproducir las condiciones de la solución analítica, en la solución numérica los contornos inferior ($y = -0.04\,\mathrm{m}$) y superior ($y = 4\,\mathrm{m}$) se consideran impermeables —condición de contorno de tipo Neumann— y en los contornos izquierdo ($x = 0\,\mathrm{m}$) y derecho ($x = 10\,\mathrm{m}$) se impone el nivel piezométrico $h = 1\,\mathrm{m}$ y $h = 0\,\mathrm{m}$, respectivamente —condición de contorno de tipo Dirichlet. La conductividad hidráulica de la fractura ($K_f = 10^{-2}\,\mathrm{md^{-1}}$) es cuatro órdenes de magnitud mayor que la de la matriz ($K_m = 10^{-6}\,\mathrm{md^{-1}}$). De este modo se asegura que sólo existe flujo de agua en la dirección x y que la velocidad del agua en la matriz sea muy pequeña. Para la matriz se ha empleado una dispersividad longitudinal $\alpha_L = 0\,\mathrm{m}$ y una dispersividad transversal $\alpha_T = 100\,\mathrm{m}$, para reproducir un coeficiente de difusión efectivo en la matriz

$$D_m = \alpha_T\, q_x = \alpha_T\, K_m\, i = 10^{-5}\,\mathrm{m^2d^{-1}}$$

† La solución analítica dada por Grisak y Pickens[13] asume que la fractura tiene porosidad unidad ($\phi_f = 1$).

donde q_x es la componente horizontal de la velocidad de Darcy e i es el gradiente de nivel piezométrico en la dirección x.

En la Figura 2 se muestra la malla de elementos finitos empleada en este caso. En el Modelo 2D la fractura se ha discretizado con elementos cuadrangulares lineales (2 elementos en la dirección y) para un total de 1 100 elementos y 1 173 nudos. En el Modelo 1D la fractura se discretiza con elementos unidimensionales lineales para un total de 1 050 elementos y 1 071 nudos. Ambas mallas coinciden excepto en la discretización de la fractura. Para la discretización temporal, se emplea en todos los casos un esquema de Crank-Nicolson (factor de ponderación temporal $\theta = 0.5$) y un incremento de tiempo que aumenta progresivamente desde $\Delta t = 0.1\,d$ hasta $\Delta t = 20\,d$.

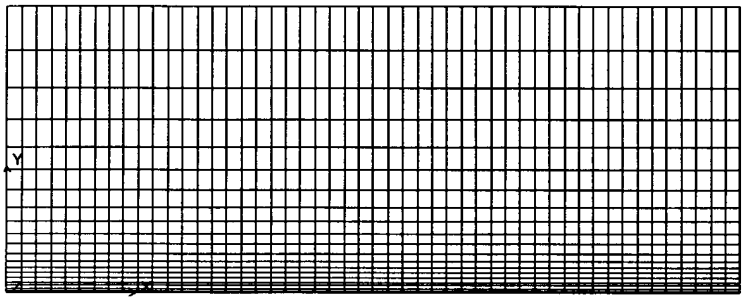

Figura 2. Malla de elementos finitos del Caso 1 para el Modelo 2D (fractura discretizada con elementos 2D)

Resultados

En la Figura 3 se muestran las concentraciones en la matriz al cabo de 1 000 días obtenidas a partir solución analítica dada por la Ecuación (7). Las calculadas con los Modelos 2D y 1D se representan en las Figuras 4 y 5, respectivamente. Las únicas discrepancias entre la solución analítica y las numéricas se encuentran localizadas en el contorno izquierdo, debido a que en el modelo numérico existe una pequeña entrada de agua por dicho contorno que la solución analítica no considera. Se observa que las isolíneas de concentraciones calculadas con ambos modelos coinciden con las de la solución analítica, comprobándose por tanto que el código resuelve correctamente la ecuación de transporte de solutos en estas condiciones.

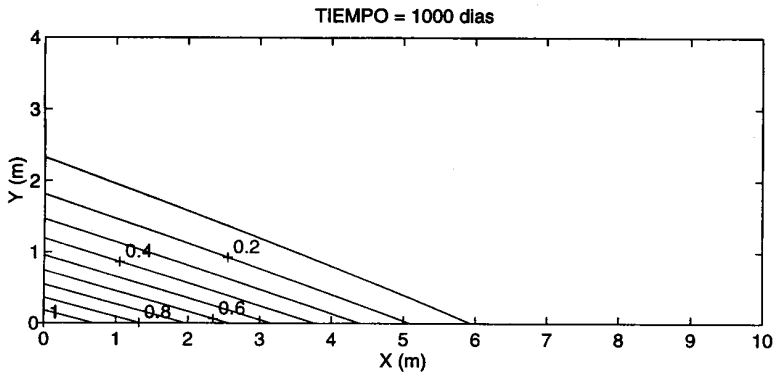

Figura 3. Concentraciones en la matriz al cabo de 1 000 días. Solución analítica

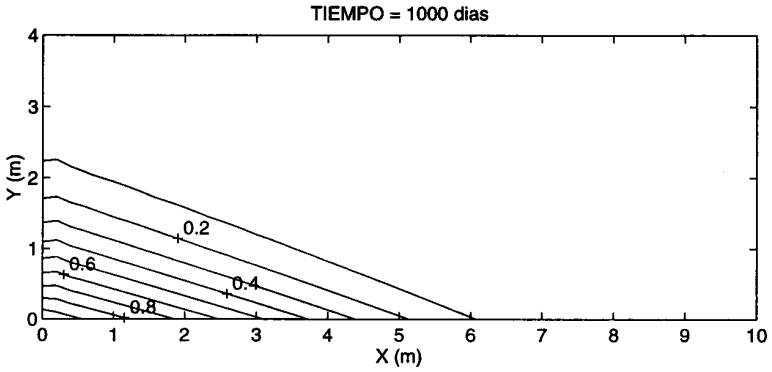

Figura 4. Concentraciones en la matriz al cabo de 1 000 días. Solución numérica del Modelo 2D

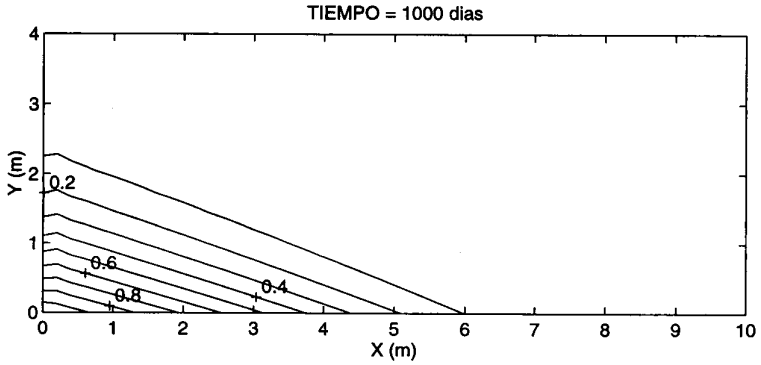

Figura 5. Concentraciones en la matriz al cabo de 1 000 días. Solución numérica del Modelo 1D

La Figura 6 muestra la distribución de la concentración del soluto a lo largo de la fractura ($y = 0$) al cabo de 200, 600 y 1 000 días. Se representan conjuntamente la solución analítica —Ecuación (6)— y la solución numérica para ambos modelos. Cabe destacar que la solución del Modelo 1D —fracturas con elementos 1D— es más precisa que la solución del Modelo 2D —fracturas con elementos 2D. Para una misma discretización espacial y temporal, el Modelo 1D presenta menos dispersión numérica. Las pequeñas discrepancias entre la solución del Modelo 1D y la solución analítica se deben a que el modelo numérico considera una pequeña dispersividad longitudinal en la fractura ($\alpha_L = 0,025\,\mathrm{m}$) para evitar un número de Peclet[†] excesivamente elevado, que podría ocasionar oscilaciones espúreas. Por contra, la solución analítica considera que en la fractura sólo existe advección, siendo nulo el transporte dispersivo.

[†] El número de Peclet es un número adimensional que representa el cociente entre el transporte advectivo y el transporte difusivo-dispersivo. En el caso —muy frecuente— de que la difusión molecular sea despreciable frente a la dispersión mecánica, el número de Peclet de la malla se expresa como $Pe = \Delta x/\alpha_L$ donde Δx es la longitud del elemento en la dirección del flujo y α_L es la dispersividad longitudinal.

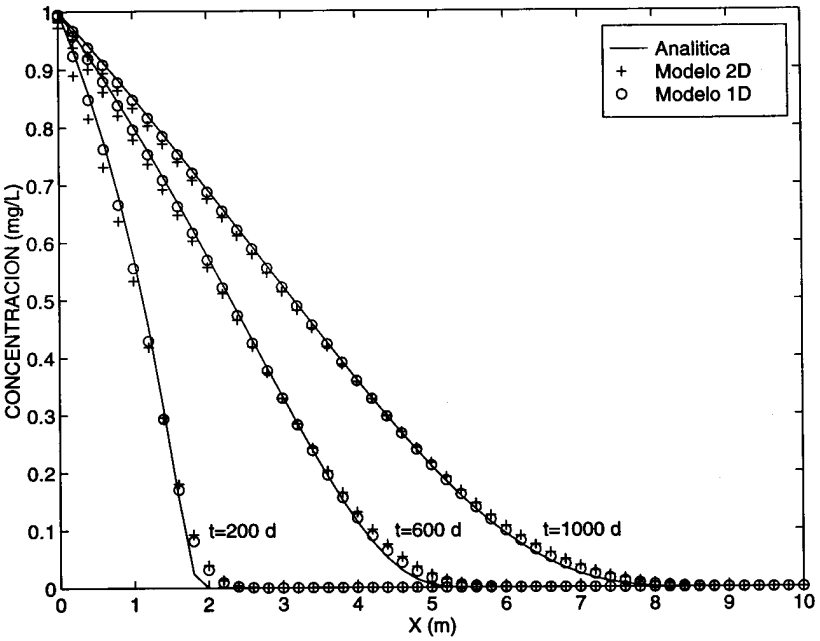

Figura 6. Evolución de las concentraciones en la fractura. Comparación de la solución analítica (línea continua), Modelo 2D (cruces) y Modelo 1D (círculos)

CASO 2: BLOQUE RECTANGULAR DE ROCA CON FRACTURAS ORTOGONALES INTERCONECTADAS

Descripción del problema

El segundo caso considera el flujo de agua y el transporte de un soluto a través de un bloque de roca que contiene una red de fracturas ortogonales conectadas entre sí tal como se muestra en la Figura 7. Al igual que en el caso anterior, se considera que los contornos superior e inferior son impermeables. En los contornos laterales se impone el nivel piezométrico ($h = 1\,\mathrm{m}$ en el contorno izquierdo y $h = 0\,\mathrm{m}$ en el contorno derecho), de tal forma que el flujo discurre de izquierda a derecha, preferentemente por la red de fracturas —debido a su mayor conductividad hidráulica. El flujo de agua es estacionario. Inicialmente la concentración del soluto es cero y el agua que entra por la fractura lo hace con una concentración C_0.

Este caso considera aspectos más realistas del flujo y transporte en medios fracturados. Por ello, sirve para ilustrar la aplicabilidad de la formulación a condiciones reales. Además, se ha utilizado este caso para realizar una comparación exhaustiva entre el modelo numério propuesto y el tratamiento convencional de elementos finitos.

Solución numérica

Empleando la misma nomenclatura que en el caso anterior, el Modelo 2D corresponde a la discretización de las fracturas mediante elementos bidimensionales, mientras que el Modelo 1D se basa en la formulación propuesta en el primer artículo de esta serie[2], en el que se discretizan las fracturas con elementos unidimensionales. En la Tabla I se recogen los valores numéricos de los parámetros de flujo y transporte de la matriz y de la zona fracturada. La concentración del agua que entra por la fractura es $C_0 = 1\,\mathrm{mgL}^{-1}$.

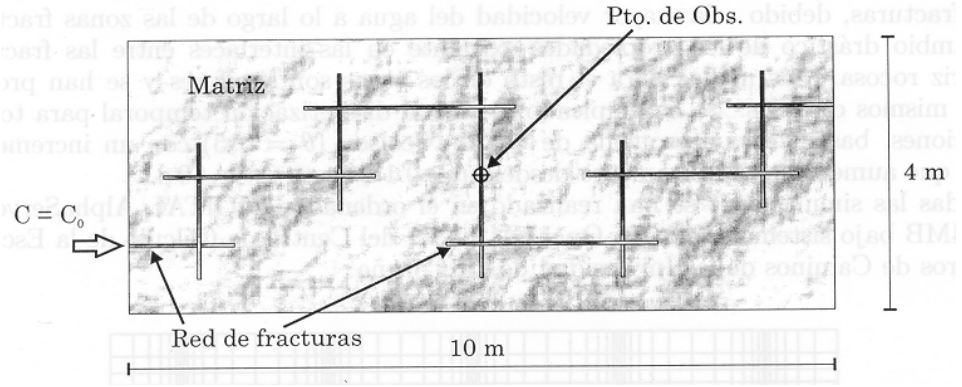

Figura 7. Esquema del problema para el Caso 2

Parámetro	Descripción	Matriz	Fractura
e	espesor	$1\,\mathrm{m}$	$1\,\mathrm{m}$
$2b$	apertura	–	$0.04\,\mathrm{m}$
K	conductividad hidráulica	$10^{-5}\,\mathrm{md}^{-1}$	$10^{-2}\,\mathrm{md}^{-1}$
S_s	coef. almacenamiento específ.	$10^{-6}\,\mathrm{m}^{-1}$	$10^{-3}\,\mathrm{m}^{-1}$
ϕ	porosidad	0.01	0.1
α_L	dispersividad longitudinal	$10^{-2}\,\mathrm{m}$	$5\times10^{-2}\,\mathrm{m}$
α_T	dispersividad transversal	$2\times10^{-3}\,\mathrm{m}$	$10^{-2}\,\mathrm{m}$
D	coef. difusión efectivo	$10^{-6}\,\mathrm{m}^2\mathrm{d}^{-1}$	$10^{-5}\,\mathrm{m}^2\mathrm{d}^{-1}$

Tabla I. Parámetros de flujo y transporte del Caso 2

Para ambos modelos se han realizado simulaciones con distintas mallas de elementos finitos, progresivamente más refinadas. En la Tabla II se recogen las características fundamentales de las mallas empleadas, así como la nomenclatura utilizada posteriormente en la discusión de resultados.

Identificador de la malla	Número de nudos	Número de elementos	Tipo de elementos	Ancho de banda inicial	Ancho de banda final
M2D_2K	2112	2015	2D lineales	451	53
M2D_6K	6105	5940	2D lineales	5664	90
M2D_20K	18149	5940	2D cuadráticos	17067	269
M1D_2K	2201	2314	2D y 1D lineales	538	51
M1D_6K	6501	2314	2D y 1D cuadráticos	4802	152
M1D_20K	19705	6962	2D y 1D cuadráticos	18830	292

Tabla II. Características de las mallas de elementos finitos empleadas para las distintas simulaciones del Caso 2

En la Figura 8 se muestra la malla de elementos finitos correspondiente al Modelo 2D que contiene 2 112 nudos. Se puede observar que la malla se ha refinado en el entorno de las fracturas, debido a la mayor velocidad del agua a lo largo de las zonas fracturadas y al cambio drástico de las propiedades existente en las interfaces entre las fracturas y la matriz rocosa. Las mallas para el resto de los casos son similares y se han procesado con los mismos criterios. Se ha empleado la misma discretización temporal para todas las simulaciones, basada en un esquema de Crank-Nicolson ($\theta = 0,5$) con un incremento de tiempo que aumenta progresivamente desde $\Delta t = 0.1\,\mathrm{d}$ hasta $\Delta t = 10\,\mathrm{d}$.

Todas las simulaciones se han realizado en el ordenador DIGITAL AlphaServer 4000 5/466 4MB bajo sistema operativo OpenVMS V7.1 del Centro de Cálculo de la Escuela de Ingenieros de Caminos de la Universidad de La Coruña.

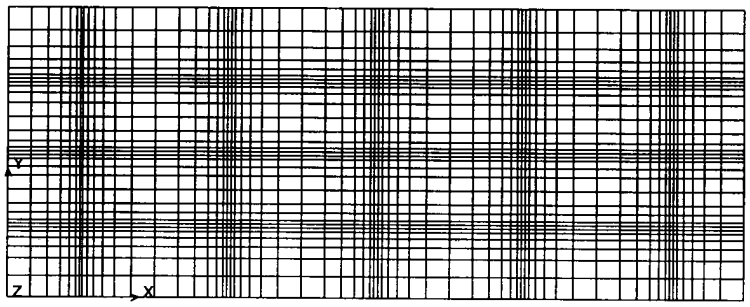

Figura 8. Malla de elementos finitos del Caso 2 para el Modelo 2D con 2 112 nudos

Resultados

En este apartado se presentan los resultados obtenidos en las seis simulaciones realizadas. En primer lugar se comentan los resultados de flujo. Por su mayor relevancia, se dedica un análisis más detallado a los resultados del transporte de solutos.

Las soluciones numéricas de la ecuación de *flujo* estacionario obtenida con el Modelo 2D con las mallas M2D_2K y M2D_6K se muestran en las Figuras 9 y 10, respectivamente. No se presenta la solución obtenida en la pasada M2D_20K por ser prácticamente igual a la de la simulación M2D_6K. Las pequeñas diferencias entre las Figuras 9 y 10 indican que es necesaria una malla del orden de los 6 000 nudos para obtener una solución precisa de la ecuación de flujo cuando se emplea el Modelo 2D. Las Figuras 11 y 12 muestran la solución de la ecuación de flujo obtenida con el Modelo 1D con las mallas M1D_2K y M1D_6K, respectivamente. Los valores numéricos de ambas pasadas difieren en la cuarta cifra significativa, de modo que una malla de 2 000 nudos es suficiente para este caso. Las simulaciones M2D_6K y M1D_6K proporcionan prácticamente los mismos resultados.

Las Figuras 13 a 24 muestran los mapas de concentraciones correspondientes a las seis pasadas al cabo de 2 000 y 10 000 días. Las concentraciones obtenidas en la pasada M2D_2K con el Modelo 2D y una malla de 2 112 nudos (Figuras 13 y 14) difieren claramente de las obtenidas con el mismo modelo pero con una malla de 6 105 nudos (véanse las Figuras 15 y 16). Estas diferencias ponen de manifiesto que la discretización empleada no es suficiente para obtener una solución numérica aceptable. Este efecto persiste incluso con una discretización todavía más fina. Las Figuras 17 y 18 ilustran que los resultados correspondientes al Modelo 2D con una malla de 18 149 nudos (M2D_20K) son visualmente distintos a los de las Figuras 15 y 16. Además, la tendencia no es errática: cuanto más fina es la discretización espacial, mayor es la concentración de soluto en todo el dominio para un tiempo dado —se pueden comparar, por ejemplo, las Figuras 14, 16 y 18. Este hecho indica que, cuando se emplea el Modelo 2D para la resolución de la ecuación de transporte

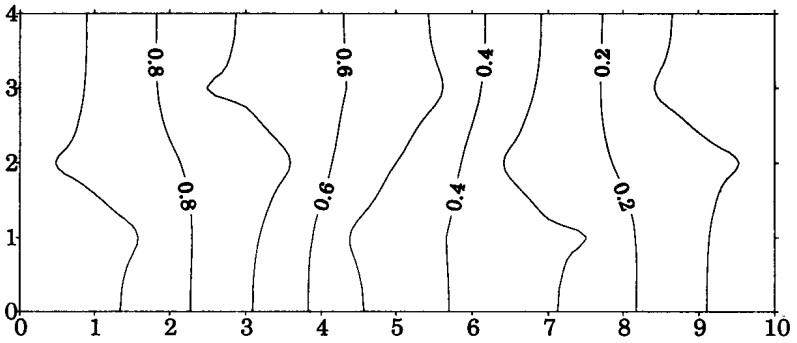

Figura 9. Mapa de niveles piezométricos (flujo estacionario) para el Modelo 2D con 2 112 nudos (M2D_2K)

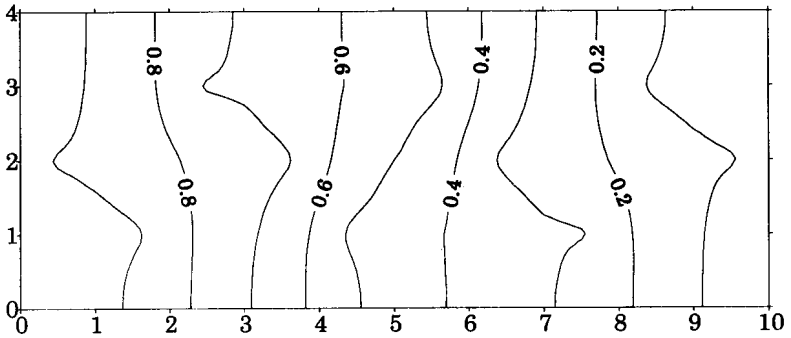

Figura 10. Mapa de niveles piezométricos (flujo estacionario) para el Modelo 2D con 6 105 nudos (M2D_6K)

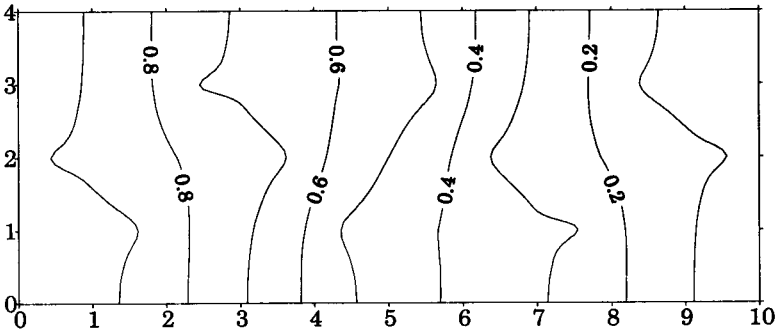

Figura 11. Mapa de niveles piezométricos (flujo estacionario) para el Modelo 1D con 2 201 nudos (M1D_2K)

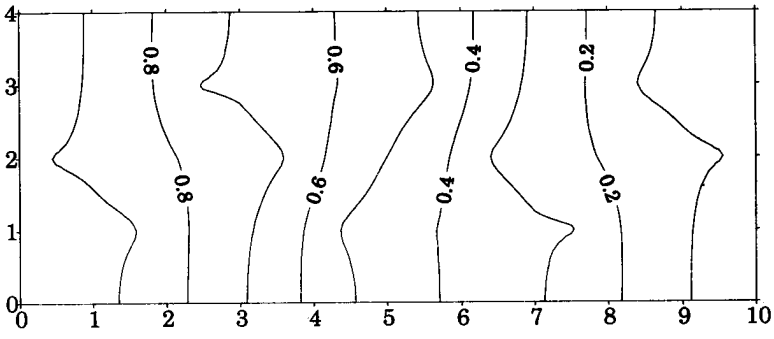

Figura 12. Mapa de niveles piezométricos (flujo estacionario) para el Modelo 1D con 6 501 nudos (M1D_6K)

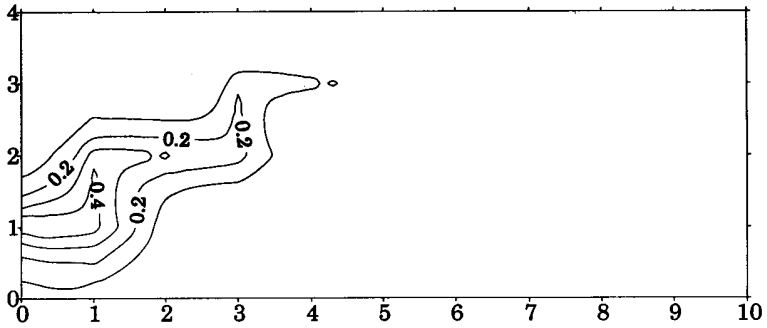

Figura 13. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 2D con 2 112 nudos (M2D_2K)

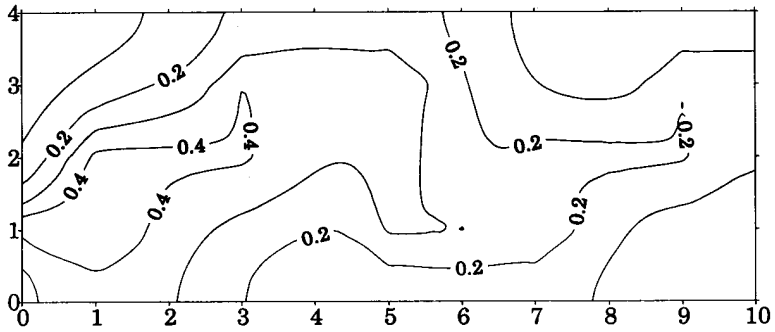

Figura 14. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 2 112 nudos (M2D_2K)

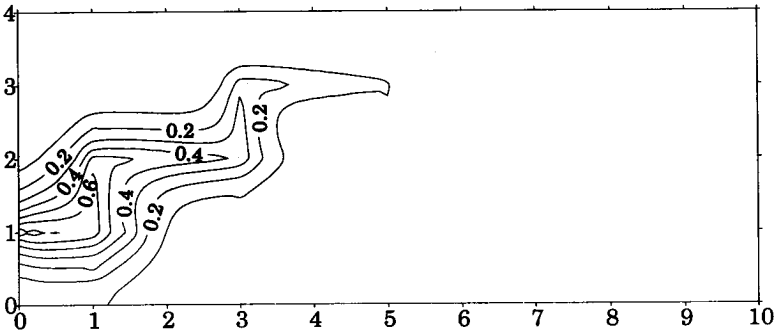

Figura 15. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 2D con 6 105 nudos (M2D_6K)

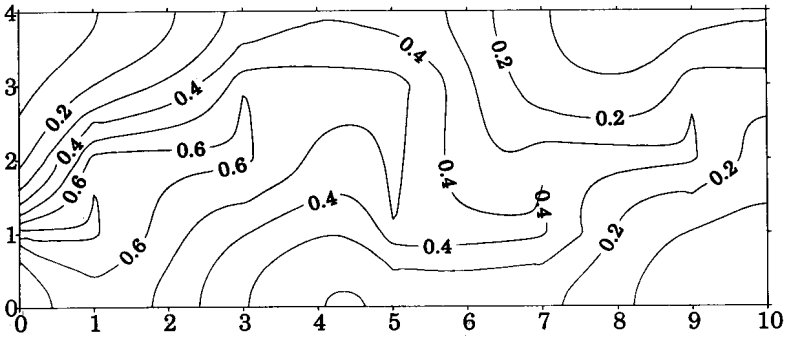

Figura 16. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 6 105 nudos (M2D_6K)

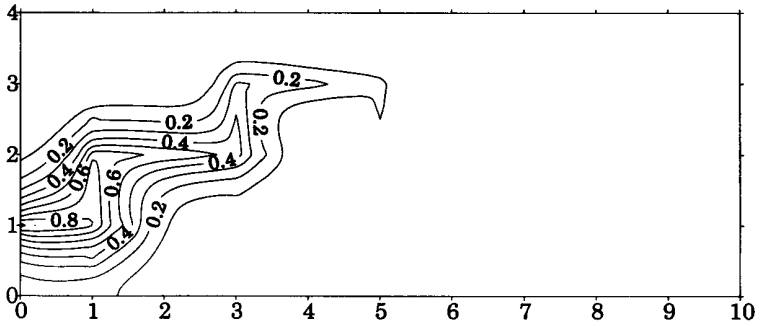

Figura 17. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 2D con 18 149 nudos (M2D_20K)

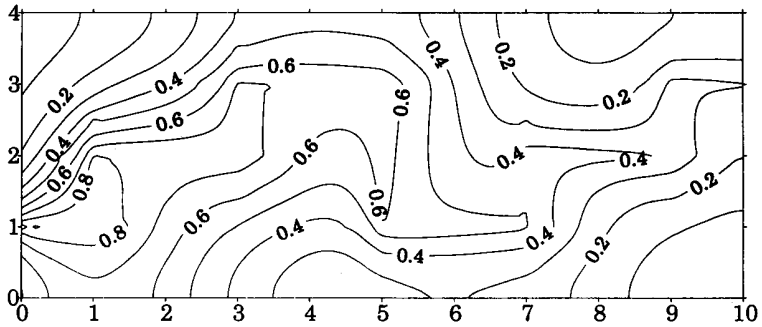

Figura 18. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 18 149 nudos (M2D_20K)

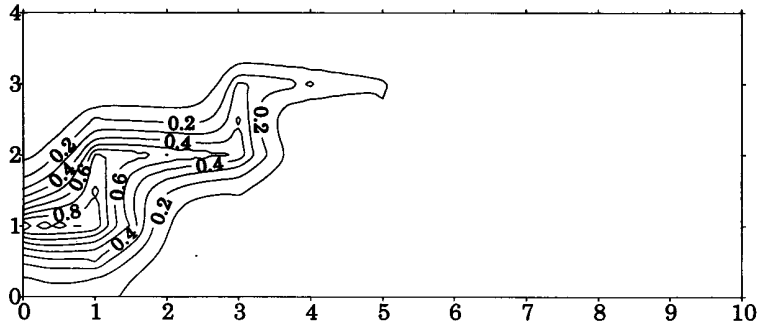

Figura 19. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 1D con 2 201 nudos (M1D_2K)

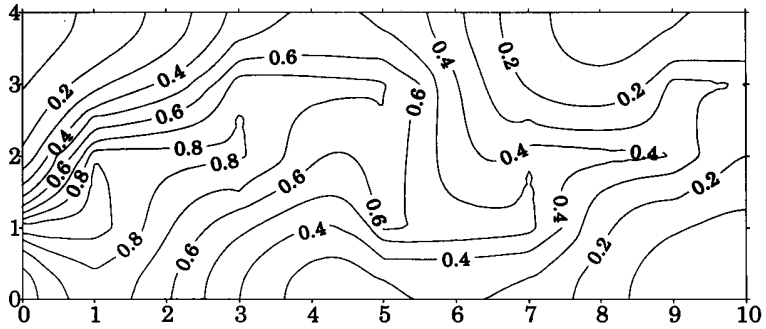

Figura 20. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 1D con 2 201 nudos (M1D_2K)

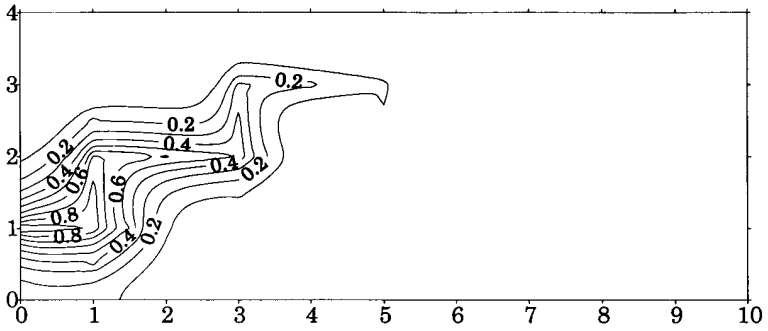

Figura 21. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 1D con 6 501 nudos (M1D_6K)

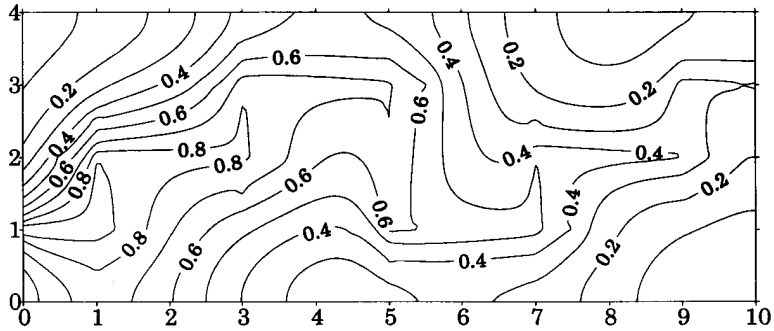

Figura 22. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 1D con 6 501 nudos (M1D_6K)

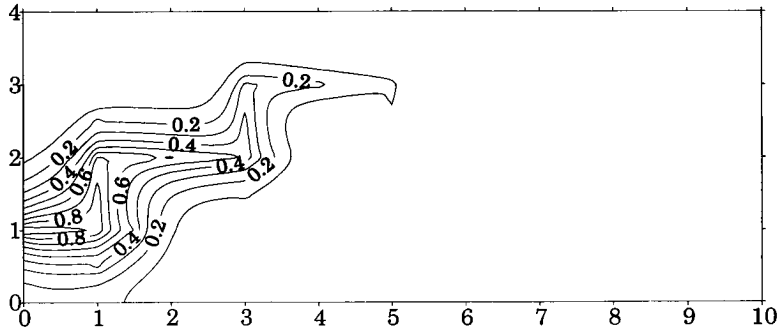

Figura 23. Mapa de concentraciones a tiempo T=2 000 días para el Modelo 1D con 19 705 nudos (M1D_20K)

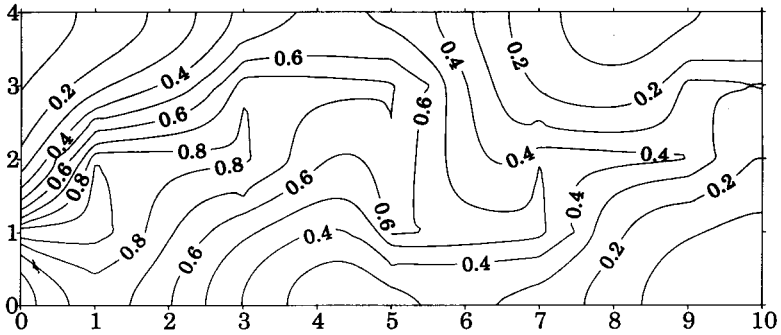

Figura 24. Mapa de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 1D con 19 705 nudos (M1D_20K)

de solutos, es necesario recurrir a una discretización muy fina para representar de forma apropiada la heterogeneidad del medio. La explicación matemática de este efecto es objeto de futura investigación.

Los resultados obtenidos con el Modelo 1D muestran un comportamiento muy distinto. Con una malla de 2 201 nudos (M1D_2K) se obtienen los resultados que se muestran en las Figuras 19 y 20, mientras que los obtenidos con una malla de 6 501 nudos (M1D_6K) se representa en las Figuras 21 y 22. Se puede comprobar que ambas simulaciones proporcionan resultados cuyas diferencias son gráficamente casi imperceptibles. Los valores numéricos sólo difieren en la segunda o tercera cifra significativa. Los resultados con una malla de 19 705 nudos (M1D_20K), que se muestran en las Figuras 23 y 24, son virtualmente idénticos a los de la pasada M1D_6K.

Las *curvas de paso* del soluto —concentración en función del tiempo— en el punto de observación (ver Figura 7) para las seis simulaciones realizadas se muestran en la Figura 25. El punto de observación está situado en el interior de una fractura en el centro geométrico del dominio ($x = 5\,\mathrm{m}$, $y = 2\,\mathrm{m}$). Las curvas correspondientes al Modelo 1D (pasadas M1D_2K, M1D_6K y M1D_20K) son coincidentes. Asimismo, puede observarse que las soluciones obtenidas con el Modelo 2D se aproximan a las del Modelo 1D a medida que se utiliza una discretización más fina.

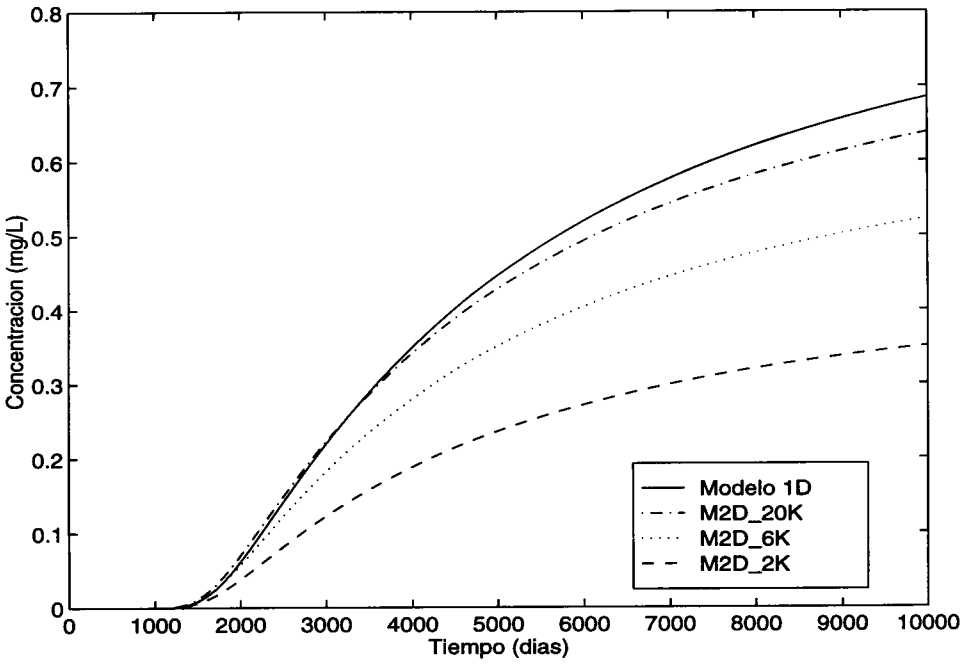

Figura 25. Curvas de paso del soluto en el punto de observación indicado en la Figura 7, para los Modelos 1D y 2D y las distintas mallas empleadas

Con el fin de cuantificar el mejor comportamiento numérico del Modelo 1D frente al Modelo 2D, se presentan los mapas de *errores* absolutos en concentraciones al cabo de 10 000 días, normalizados respecto a la concentración C_0 del agua de entrada. Se ha tomado como solución "exacta" la obtenida con el Modelo 1D con una malla de 19 705 nudos. El mapa de errores para el Modelo 2D y una malla con 2 112 nudos se representa en la Figura 26. Se observa que el error máximo es próximo al 50% y que las isolíneas de errores presentan un aspecto parecido a las isolíneas de concentraciones (compárense las Figuras 14 y 26). Se puede comprobar que los errores son grandes en todo el dominio, aunque los máximos relativos se alcanzan en torno a las fracturas y especialmente cerca del punto de inyección.

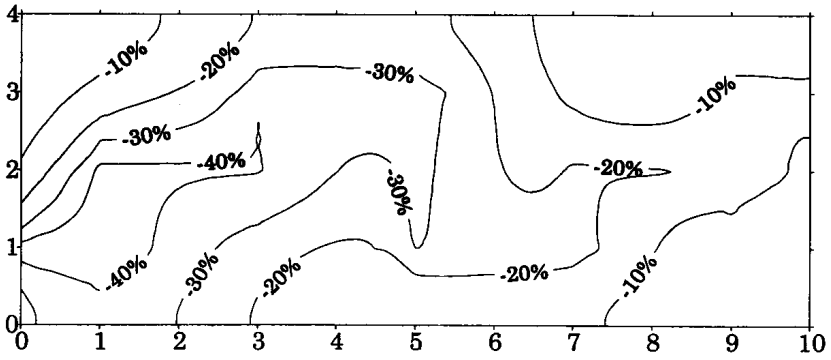

Figura 26. Mapa de **errores** de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 2 112 nudos (M2D_2K)

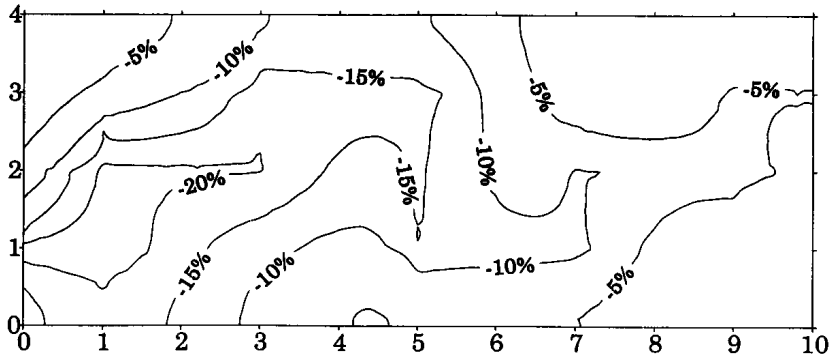

Figura 27. Mapa de **errores** de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 6 105 nudos (M2D_6K)

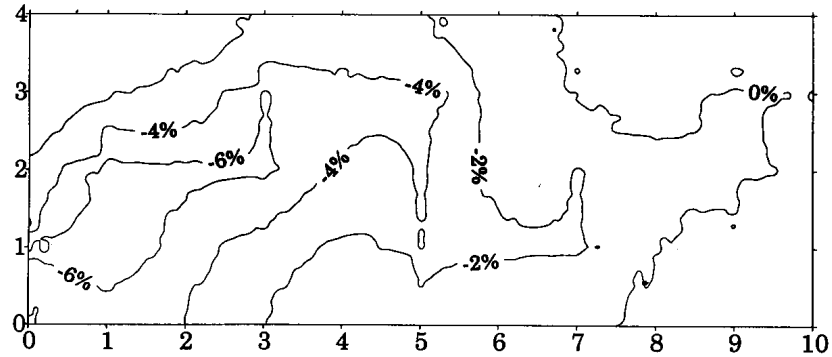

Figura 28. Mapa de **errores** de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 2D con 18 149 nudos (M2D_20K)

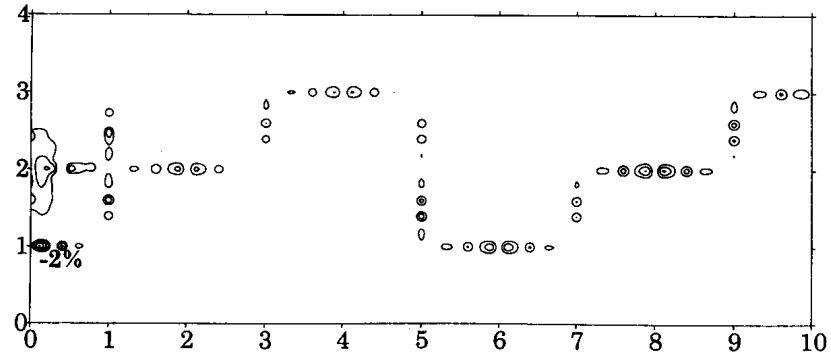

Figura 29. Mapa de **errores** de concentraciones a tiempo T=10 000 días para el Modelo 1D con 2 201 nudos (M1D_2K)

El mapa de errores para el Modelo 2D con una malla de 6 105 nudos se muestra en la Figura 27. Las características son muy parecidas a las de la pasada anterior, con errores generalizados que reproducen el patrón de las isolíneas de concentración (compárense las Figuras 16 y 27) y con un error máximo cercano al 25%. En la Figura 28 se representan los errores correspondientes al Modelo 2D con una malla de 18 149 nudos. Son aplicables los mismos comentarios que para las pasadas anteriores, aunque el error máximo es en este caso del 8%. La Figura 29 muestra los errores en concentraciones de la solución numérica obtenida con el Modelo 1D con una malla de 2 201 nudos. Se aprecia un comportamiento completamente diferente al de las simulaciones con el Modelo 2D. El error máximo es tan sólo del 2% y los errores se encuentran localizados en el entorno de las fracturas, a pesar de que la discretización empleada es relativamente grosera. Es evidente que estos resultados son de una calidad excepcional, especialmente si se comparan con los que proporciona el Modelo 2D para un coste computacional similar (M2D_2K): el error máximo es 20 veces menor y los errores se concentran en el entorno de las fracturas. Los errores correspondientes al Modelo 1D con 6 501 nudos son virtualmente nulos.

En la Tabla III se recogen a modo de conclusión los resultados más relevantes de las distintas simulaciones realizadas.† De estos resultados se concluye que el Modelo 1D —en el que las fracturas se discretizan mediante elementos unidimensionales— propuesto en esta serie de artículos proporciona resultados mucho mejores que los del Modelo 2D —fracturas discretizadas con elementos bidimensionales— para la solución numérica de la ecuación del transporte de solutos en medios fracturados.

Identificador de la malla	Número de nudos	Memoria (MB)	Tiempo CPU (s)	Error máx. (%)	Error medio (%)
M2D_2K	2112	4.2	46.9	−49.7	−20.4
M2D_6K	6105	19.0	374.8	−24.2	−9.5
M2D_20K	18149	159.6	3438.6	−8.0	−2.3
M1D_2K	2201	4.7	50.5	−2.48	−0.16
M1D_6K	6501	33.0	450.3	−0.21	−0.00
M1D_20K	19705	196.4	4320.2	–	–

Tabla III. Características y resultados de las simulaciones realizadas para el Caso 2

CASO 3: BLOQUE DE ROCA TRIDIMENSIONAL CON UNA FRACTURA VERTICAL

Descripción del problema

El tercer caso sintético corresponde a un ensayo de trazadores en un bloque de roca tridimensional de dimensiones $80 \times 40 \times 20\,\mathrm{m}^3$ que contiene una fractura vertical en el plano $y = 0\,\mathrm{m}$ (Figura 30). Todos los contornos son impermeables —condición de contorno de tipo Neumann con caudal nulo—, excepto la arista vertical $x = 0\,\mathrm{m}$, $y = 20\,\mathrm{m}$, en la que se fija el nivel piezométrico ($h = 0\,\mathrm{m}$). Esta arista coincide con un pozo de inyección, por el que se inyecta agua con una concentración $C_0 = 1\,\mathrm{mgL}^{-1}$. Se bombea un caudal puntual $Q = 1\,\mathrm{m}^3\mathrm{d}^{-1}$ en el vértice $x = 80\,\mathrm{m}$, $y = -20\,\mathrm{m}$, $z = 0\,\mathrm{m}$. Se considera flujo estacionario y transporte transitorio. Inicialmente la concentración de soluto es nula en todo el dominio.

† El error medio se ha calculado como $e_{\mathrm{medio}} = \frac{1}{A}\int_\Omega e(\bar{x})\,d\bar{x}$, utilizando la regla de Simpson sobre una superficie krigeada con 101×41 puntos.

Con este caso se pretende ilustrar el potencial del código TRANMEF-3 para la simulación de problemas complejos de flujo y transporte de solutos en medios porosos y fracturados tridimensionales.

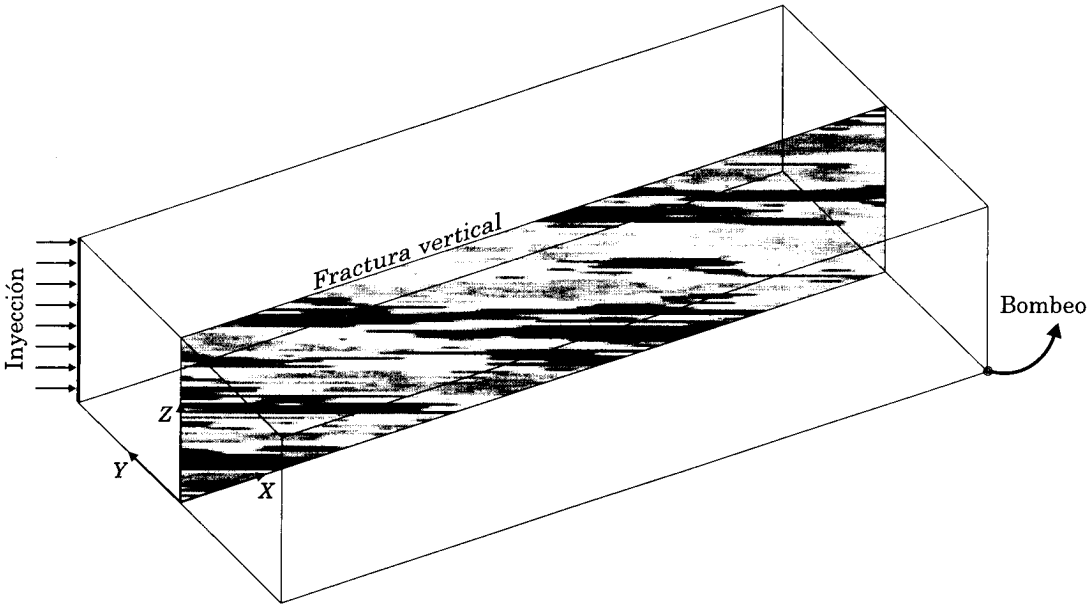

Figura 30. Esquema del Caso 3, correspondiente a una inyección de soluto por una de las aristas y bombeo en la esquina opuesta

Solución numérica

Al igual que en el Caso 2, se han utilizado dos esquemas numéricos distintos: el "Modelo 3D", en el que las fracturas se discretizan mediante elementos tridimensionales y el "Modelo 2D", que emplea la formulación propuesta en esta serie de artículos y en el que las fracturas se discretizan con elementos bidimensionales. Dado que en el caso sintético anterior ya se ha realizado un análisis detallado de las ventajas numéricas de la formulación propuesta, se muestran sólamente los resultados correspondientes al Modelo 2D. Para la discretización del pozo de inyección se han empleado elementos unidimensionales. Los parámetros de flujo y transporte de solutos utilizados para la matriz rocosa, la fractura y el pozo se recogen en la Tabla IV.

Parámetro	Descripción	Matriz	Fractura	Pozo
e	espesor	–	$0.1\,\mathrm{m}$	–
A_t	área transversal	–	–	$0.01\,\mathrm{m}^2$
K	conductividad hidráulica	$10^{-6}\,\mathrm{md}^{-1}$	$10^{-2}\,\mathrm{md}^{-1}$	$10^{2}\,\mathrm{md}^{-1}$
S_s	coef. almacenamiento específ.	$10^{-6}\,\mathrm{m}^{-1}$	$10^{-3}\,\mathrm{m}^{-1}$	$1\,\mathrm{m}^{-1}$
ϕ	porosidad	0.01	0.1	1
α_L	dispersividad longitudinal	$0.5\,\mathrm{m}$	$1\,\mathrm{m}$	$1\,\mathrm{m}$
α_T	dispersividad transversal	$0.1\,\mathrm{m}$	$0.2\,\mathrm{m}$	$1\,\mathrm{m}$
D	coef. difusión efectivo	$10^{-6}\,\mathrm{m}^2\mathrm{d}^{-1}$	$10^{-5}\,\mathrm{m}^2\mathrm{d}^{-1}$	$10^{-4}\,\mathrm{m}^2\mathrm{d}^{-1}$

Tabla IV. Parámetros de flujo y transporte del Caso 3

La Figura 31 muestra la malla de elementos finitos empleada, que consta de 16 410 elementos y 18 491 nudos. Como se puede apreciar, la malla se ha refinado en el entorno de la fractura, ya que es en esa zona donde se producen los cambios más bruscos en los parámetros de flujo y transporte, en el campo de velocidades y los mayores gradientes de concentraciones. En mallas de este tipo, en las que el número de nudos es elevado, es crucial realizar una renumeración de los nudos de la malla, que permite reducir drásticamente el coste computacional. En este caso, el máximo semiancho de banda se reduce de 11 072 a 739.

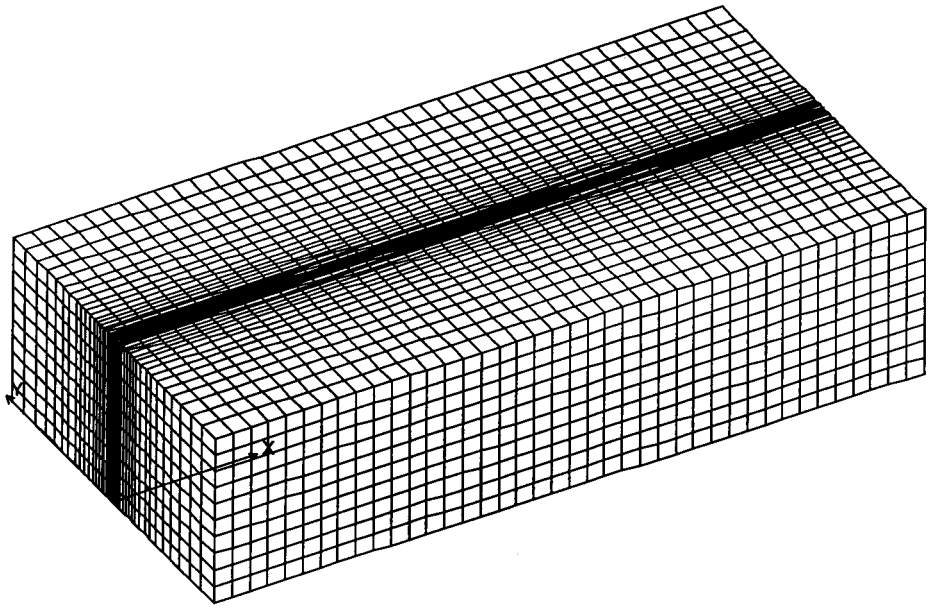

Figura 31. Malla de elementos finitos del Caso 3

Resultados

La distribución espacial tridimensional de las concentraciones de soluto al cabo de 200, 1 000 y 5 000 días se muestra en las Figuras 32, 33 y 34, respectivamente. La evolución del transporte del soluto sigue el patrón que cabría esperar. El soluto se transporta desde el pozo de inyección a través de la matriz rocosa por advección y dispersión hidrodinámica hasta que alcanza la fractura. A partir de ese momento el soluto se canaliza por la fractura, debido a que la conductividad hidráulica de este material es mucho mayor. Se debe destacar la gran calidad de la solución numérica en el entorno de la fractura, donde se reproduce una variación espacial de la concentración en todo su rango —de 0 a C_0— de forma muy localizada (ver Figura 32). A medida que avanza el tiempo, en la parte anterior del macizo ($y < 0$) y cerca del contorno derecho ($x = 80\,\mathrm{m}$) el soluto migra hacia el punto de bombeo, mientras que cerca del contorno izquierdo ($x = 0$) el proceso dominante es la difusión en la matriz.

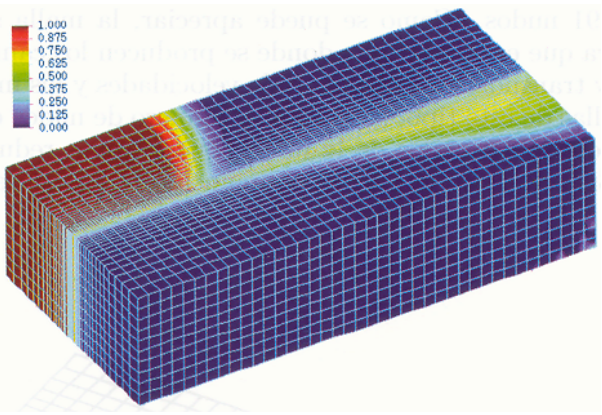

Figura 32. Mapa de concentraciones al cabo de 200 días

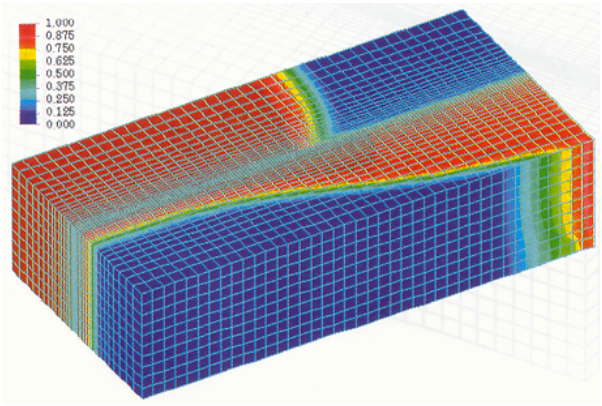

Figura 33. Mapa de concentraciones al cabo de 1 000 días

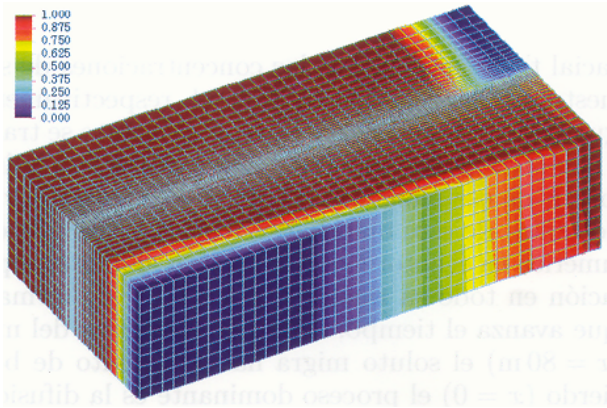

Figura 34. Mapa de concentraciones al cabo de 5 000 días

CONCLUSIONES

En el segundo de esta serie de dos artículos se han presentado las características del código TRANMEF-3[1,16], así como su aplicación a varios casos sintéticos de flujo y transporte de solutos en medios porosos y fracturados. En este código se ha implementado una formulación matemática compacta, general y eficiente para el tratamiento de las fracturas, descrita en detalle en el primer artículo[2].

El primer caso ha servido para verificar la formulación propuesta mediante su comparación con la formulación tradicional y la solución analítica. Con el segundo caso se ha demostrado que el Modelo 1D —fracturas discretizadas con elementos unidimensionales— proporciona resultados mucho más precisos que el Modelo 2D —fracturas discretizadas con elementos bidimensionales— para la solución numérica de la ecuación de transporte de solutos. En particular, la solución que se obtiene con el Modelo 1D con una malla de 2 201 nudos presenta un error máximo del 2%, frente al 50% del Modelo 2D con 2 112 nudos y al 8% con 18 149 nudos. Desde un punto de vista de eficiencia numérica, la formulación propuesta permite obtener soluciones más precisas con un coste computacional —memoria utilizada y tiempo de CPU— varios órdenes de magnitud inferior (ver Tabla III). Con el tercer caso se ha ilustrado la generalidad y flexibilidad de la formulación propuesta para la integración en fracturas y condiciones de contorno, mostrando su aplicación a la simulación de un ensayo de trazadores en un medio tridimensional fracturado.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se ha realizado en el marco de proyectos de investigación financiados por la Empresa Nacional de Residuos Radiactivos (ENRESA), dentro del Convenio Marco con la Universidad de La Coruña y la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia: Proyectos FEBEX (cód. 703231) y de Validación de Códigos (cód. 703334). El proyecto FEBEX ha sido financiado en parte por la Comisión Europea a través del Programa de Fisión Nuclear (Proyecto F14W-CT95-0006). También se ha contado con financiación de un proyecto de investigación de la CICYT del Proyecto Nacional de Recursos Hídricos (Proyecto HID98-282).

REFERENCIAS

1 R. Juanes, "Un código para la modelización tridimensional de flujo y transporte", Proyecto Técnico, ETSI Caminos, Universidad de La Coruña, (1997).

2 R. Juanes y J. Samper, "Una formulación general y eficiente de fracturas y condiciones de contorno en el MEF: I. Aspectos teóricos", *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería*, Vol. **16**, N ° 4, pp. 471–491 (2000).

3 G. Segol, "A Three-dimensional Galerkin-Finite Element Model for the analysis of contaminant transport in saturated-unsaturated porous media", en "*Finite Elements in Water Resources*", W.G. Gray, G.F. Pinder y C.A. Brebbia (Eds.), Pentech, London, pp. 2123–2144, (1977).

4 P.S. Huyakorn, B.H. Lester y C.R. Faust, "Finite element techniques for modeling groundwater flow in factured aquifers", *Water Resour. Res.*, Vol. **19**, N ° 4, pp. 1019–1035, (1983).

5 P.S Huyakorn, B.G. Jones y P.F. Andersen, "Finite element algorithms for simulating three-dimensional groundwater flow and solute transport in multilayer systems", *Water Resour. Res.*, Vol. **22**, N ° 3, pp. 361–374, (1986).

6 G. Gambolati, F. Sartoretto y F. Uliana, "A Conjugate Gradient Finite Element Model for Large Multiaquifer Systemsp", *Water Resour. Res.*, Vol. **22**, N ° 7, pp. 1003–1015, (1986).

7 A. Medina, G. Galarza y J. Carrera, "TRANSIN-II – Simulación y estimación de parámetros en flujo y transporte en medios porosos: Manual del usuario", Barcelona, Departamento de Ingeniería del Terreno, ETSICCP, UPC, pp. 118, (1993).

8 A. Larabi y F. de Smedt, "Solving three-dimensional hexahedral finite element groundwater models by preconditioned conjugate gradient methods", *Water Resour. Res.*, Vol. **30**, N ° 2, pp. 509–521, (1994).

9 ENRESA, Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, S.A., "El Berrocal Project: Characterization and validation of natural radionuclide migration processes under real conditions on the fissured granitic environment", European Commission Contract N° F12W/CT91/0080, Vol. **4**, (1996).

10 SKB, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co, Äspö Hard Rock Laboratory, *Annual Report 1995*, Technical Report TR 96-06, (1996).

11 G.A. Galarza, A. Medina y J. Carrera, "TRANSIN-III. Applications to 3D media and non-linear problems", El Berrocal Project, Vol. **4**: Hydrogeological modelling and code development, s.l., ENRESA, pp. 423–680, (1996).

12 J. Molinero, J. Samper, R. Juanes, L. Buján y G. Zhang, "Numerical modeling of the impact of the tunnel construction on the groundwater system at Äspö", *Äspö HRL, Task Force #5*, Progress Report, (1999).

13 G.E. Grisak y J.F. Pickens, "An analytical solution for solute transport through fractured media with matrix diffusion", *J. Hydrol.*, Vol. **52**, pp. 47–57, (1981).

14 J. Carrera, X. Sánchez-Vila, I. Benet, A. Medina, G. Galarza y J. Guimerà, "On matrix diffusion: formulations, solution methods and qualitative effects", *Hydrogeology Journal*, Vol. **6**, pp. 178–190, (1998).

15 H.S. Carslaw y J.C. Jaeger, "*Conduction of Heat in Solids*", Oxford University Press, London, 2nd ed., pp. 510, (1959).

16 R. Juanes, J. Samper y J. Molinero, "Modelización numérica tridimensional de flujo de agua y transporte de solutos y calor en medios porosos y fracturados", *I Congreso Ibérico de Geoquímica*, Soria (España), pp.111–118, (1997).